

Examen 2018: Physique Atomique et Moléculaire

Jeudi 20 décembre 2018

-- TOUT DOCUMENT ET OBJET CONNECTÉ INTERDIT --

1. Question de cours

Dans le cas de l'atome d'hydrogène non perturbé, les états $2s$ et $2p$ sont dégénérés en énergie. En revanche, pour des atomes multiélectroniques décrits dans le cadre du modèle du potentiel central, cette dégénérescence est levée. Expliquer brièvement l'origine de cette dernière et donner l'ordre énergétique attendu.

2. Structure fine et effet Zeeman sur les états $n = 3$ de l'atome d'hydrogène

a. En tenant compte de la structure fine, recenser les états d'un atome hydrogénoïde ayant la valeur $n = 3$ du nombre quantique principal. Les écrire dans la base $|n, l, s, j, m_j\rangle$ et en notation spectroscopique $n l_j$.

b.

i. Dénumérer les niveaux d'énergie quand la correction énergétique associée à la structure

$$\text{fine s'écrit } \Delta E_{sf} = \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{2}{2j+1} \right).$$

ii. Calculer la position énergétique de ces niveaux par rapport à E_3 , énergie en l'absence de structure fine. On utilisera la valeur numérique $mc^2 \alpha^4 \sim 1,45 \times 10^{-3}$ eV.

c. Pour un champ magnétique \mathbf{B} dirigé selon Oz et suffisamment faible, le Hamiltonien Zeeman peut s'écrire $\hat{H}_{Zee} = g_j \frac{\mu_B}{\hbar} B \hat{j}_z$, avec $g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$.

i. Établir pour les états $|n, l, s, j, m_j\rangle$ l'expression de la correction énergétique ΔE_{Zee} associée au Hamiltonien \hat{H}_{Zee} .

ii. Calculer l'effet qu'aurait cette correction sur les états $3d_{5/2}$ pour un champ de 1 Tesla.

iii. Calculer la limite supérieure de la valeur du champ magnétique pour que l'effet de celui-ci reste faible devant celui la structure fine ; on prendra le critère $\Delta E_{SF} = 10 \Delta E_{Zee}$.

3. Etude de l'atome de Carbone

a. Donner la configuration électronique de l'état fondamental de l'atome de Carbone, donner les multiplets correspondant à cette configuration ainsi que l'ordre énergétique en appliquant les règles de Hund.

b. Dans la suite, on considère la structure fine, avec le Hamiltonien $H_{SF} = a \vec{L} \cdot \vec{S}$ ($a > 0$). Donner la base dans laquelle la représentation de ce Hamiltonien est diagonale, et donner l'énergie associée pour chacun des multiplets.

c. Etablir un diagramme des niveaux énergétiques des multiplets, avec et sans structure fine.

T.S.V.P

d. On applique maintenant un champ magnétique faible, décrit par l'effet Zeeman. Dans ce cas, le décalage énergétique induit par le champ B est donné par $\Delta E_Z = \mu_B g_J M_J B$ avec μ_B le magnéton de Bohr et $g_J = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$ le facteur de Landé. Calculer les niveaux énergétiques pour chacun des états de structure fine en fonction de $\omega_0 (= \mu_B B)$.

e. On s'intéresse à des états excités de l'atome de Carbone, en particulier à la configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$. Recenser les multiplets correspondants.

4. Rotation et vibration d'une molécule

a. On rappelle que pour un rotateur rigide, le Hamiltonien peut s'exprimer selon

$$\hat{H}_{rot} = \frac{L^2}{2\mu r^2}. \text{ Après avoir rappelé les significations physiques des paramètres } \mu \text{ et } r, \text{ donner}$$

l'expression des niveaux d'énergie du rotateur auquel on associera le nombre quantique l .

b. En utilisant les modèles de l'oscillateur harmonique (nombre quantique ν) et du rotateur rigide précédent et en supposant que les niveaux d'énergie de vibration et de rotation puissent être –en première approximation– calculés indépendamment, donner l'expression des niveaux d'énergie de rovibration pour une molécule diatomique. L'écart entre deux niveaux vibrationnels consécutifs étant beaucoup plus grand que ceux entre niveaux rotationnels, représenter soigneusement sur un schéma les premiers niveaux de rovibration pour $\nu = 0, 1$ et $l = 0, 1, 2, 3, 4$.

c. Les règles de sélection en absorption des transitions rovibrationnelles sont données par $\Delta\nu = 1$ et $\Delta l = \pm 1$. Déterminer l'expression des fréquences de rovibration possibles entre les niveaux définis à la question précédente. Faire un schéma de ces transitions.